

На правах рукописи



Баринов Александр Алексеевич

**РАЗРАБОТКА МЕТОДА РАСЧЕТА ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ  
ТОНКИХ ПЛЁНОК НА ОСНОВЕ СТАТИСТИЧЕСКИХ МОДЕЛЕЙ  
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ФОНОНОВ С ШЕРОХОВАТЫМИ ГРАНИЦАМИ  
НАНОСТРУКТУР**

Специальность 01.04.14 – Теплофизика и теоретическая теплотехника

Автореферат

диссертации на соискание учётной степени

кандидата технических наук

Москва – 2022

Работа выполнена в федеральном государственном бюджетном образовательном учреждении высшего образования «Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)» (МГТУ им. Н.Э. Баумана).

**Научный руководитель** **Хвесюк Владимир Иванович**  
доктор технических наук, профессор, профессор  
кафедры теплофизики МГТУ им. Н.Э. Баумана

**Официальные оппоненты** **Дмитриев Александр Сергеевич**  
доктор технических наук, профессор, профессор  
кафедры низких температур Федерального  
государственного бюджетного образовательного  
учреждения высшего образования «Национальный  
исследовательский университет «МЭИ»

**Колбин Илья Сергеевич**  
кандидат физико-математических наук, научного  
сотрудника отдела математического моделирования  
гетерогенных систем Вычислительного центра им.  
А.А. Дородницына Российской академии наук  
Федерального исследовательского центра «Инфор-  
матика и управление» Российской академии наук

**Ведущая организация** Федеральное государственное бюджетное  
учреждение науки «Объединенный институт  
высоких температур Российской академии наук» –  
ОИВТ РАН

Защита состоится «7» сентября 2022 г. в 14 часов 00 минут на заседании диссертационного совета Д 212.141.08 при МГТУ им. Н.Э. Баумана по адресу: 105005, г. Москва, Лефортовская набережная, д. 1, ф-т «Энергомашиностроение» ауд. 202Э.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке МГТУ им. Н.Э. Баумана и на сайте <http://www.bmstu.ru>.

Отзывы на автореферат в двух экземплярах, заверенные печатью учреждения, просьба направлять по адресу: 105005, г. Москва, ул. 2-я Бауманская, д. 5, стр. 1, МГТУ им. Н.Э. Баумана, ученому секретарю диссертационного совета Д 212.141.08.

Автореферат разослан «\_\_\_» \_\_\_\_\_ 2022 г.

Ученый секретарь  
диссертационного совета Д 212.141.08  
кандидат технических наук, доцент



Егоров К.С.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

### Актуальность темы

На протяжении последнего десятилетия наблюдается бурное развитие технологий, построенных на использовании структур микро- и наномасштаба. К примеру, в микропроцессорной электронике характерный масштаб элементной базы – транзисторов – уже составляет менее 10-нм. Тенденция к уменьшению размеров компонентов приводит к падению теплопроводности и резкому росту удельного тепловыделения за счет так называемого размерного эффекта и увеличения рассеяния фононов на границах элементов. Так как работоспособность таких устройств сильно зависит от температуры, то возникает проблема обеспечения требуемого теплового режима. В связи с этим, актуальной является разработка надёжных методов расчёта переноса тепла в наноструктурах. В основе рассмотрения процессов переноса тепла в полупроводниках и диэлектриках лежит кинетическая теория и статистика квазичастиц фононов – квантов колебаний решетки – с учетом размерного эффекта для учета влияния геометрии (размера образца) на перенос тепла.

При этом, во-первых, особо важное внимание следует уделить решению проблемы взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями, так как именно этот процесс играет *существенную либо определяющую роль* в эффективной теплопроводности. Это связано с тем, что для наноструктур интенсивность взаимодействий фононов с границами образца выше или значительно выше, чем интенсивность взаимодействия фононов внутри образца.

Во-вторых, как показывают последние экспериментальные данные по анализу свойств наноструктур, эффективная теплопроводность сильно зависит от следующих параметров шероховатости – среднеквадратичной шероховатости  $\sigma$  (высот шероховатости) и длины корреляции  $l$  (длины шероховатости). К примеру, изменение отношения  $\sigma/l$  от 0,2 до 0,6 для нанонитей ведёт к уменьшению эффективной теплопроводности в 4 раза.

В-третьих, в существующих моделях расчета теплопроводности наноструктур влияние границ на теплоперенос учитывается лишь косвенно – через так называемый параметр зеркального отражения. При этом не удается однозначно установить взаимосвязь параметра со свойствами реальной (шероховатой) поверхности. Поэтому, во-первых, на практике его используют для подгонки результатов расчета теплопроводности под экспериментальные данные. Во-вторых, это не позволяет применять данный подход для прогнозирования теплофизических свойств наноструктур, таких как эффективная теплопроводность. В-третьих, это не удается установить влияние параметров шероховатой границы (длины и высоты шероховатостей), воздействуя на которые, можно было бы эффективно управлять тепловым режимом.

В связи с вышесказанным, представляет большую актуальность разработка теории теплопроводности наноструктур с учётом шероховатости их поверхностей.

**Целью работы** является разработка расчетно-теоретической модели теплопроводности полупроводниковых наноструктур на примере пленок кремния, обладающей достаточной предсказательной силой, на основе решения

фундаментальной проблемы – строгого учета взаимодействия переносчиков тепла с шероховатыми границами твердых тел.

**Задачи работы.** Для достижения поставленной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Сформулировать модель реальной шероховатой границы наноструктур.
2. Провести анализ взаимодействия фононов с шероховатой поверхностью наноструктуры.
3. Установить, какое влияние на теплоперенос оказывают температура, характерный размер образца, длина волны фононов, их поляризация и дисперсия, анизотропия свойств и пр.
4. Разработать модель расчета длины свободного пробега фононов в результате взаимодействия с шероховатыми границами образца в баллистическом режиме теплопереноса.
5. Разработать модель расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом размерного эффекта и шероховатости границ наноструктур.
6. Создать программу для расчета эффективной теплопроводности пленок согласно разработанной модели.
7. Провести расчет эффективной теплопроводности пленок кремния в широком диапазоне толщин, температур и шероховатостей поверхности образца для валидации и верификации предложенного метода расчета.

#### **Научная новизна работы**

1. Впервые применено описание шероховатой границы с помощью задания распределения градиентов наклона статистически случайного профиля. А также разработан метод расчета взаимодействия фононов с шероховатыми поверхностями твёрдых тел, основанный на применении приближения Кирхгофа – рассмотрении касательных плоскостей, от которых происходит отражение фононов при взаимодействии с каждой точкой шероховатой поверхности и определении углов отражения от такой поверхности.

2. Впервые развит метод расчёта длин свободного пробега баллистических фононов в зависимости от геометрии образца (толщины и длины плёнки), шероховатости (среднеквадратичной шероховатости и длины корреляции) и свойств фононного газа (длины волны фононов, поляризации) с учетом анизотропии теплового потока. В результате обнаружен существенный рост длины пробега при скользящих углах распространения фононов и уменьшении средних градиентов наклона профиля.

3. Сформулирована модель для расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок, не содержащая подгоночных параметров и учитывающая шероховатость поверхности, толщину и длину плёнки, а также анизотропию в продольном и поперечном направлениях.

4. Впервые в рамках одной модели проведены расчёты эффективной теплопроводности нанопленок с учётом указанных в предыдущих пунктах факторов (в зависимости от температуры, толщины и длины плёнки, средних углов наклона шероховатостей; с учетом анизотропии). Показано хорошее согласие расчётных и экспериментальных данных.

**Достоверность и обоснованность** полученных результатов обеспечивается строгостью используемого математического аппарата, адекватностью физических моделей и подтверждается сопоставлением результатов расчетов с экспериментальными данными и результатами, полученными другими авторами.

### **Теоретическая значимость работы**

1. Развита полноценная теоретическая основа расчёта процессов рассеяния фононов на шероховатых поверхностях наноструктур в баллистическом режиме теплопереноса в зависимости от ряда определяющих факторов: геометрических параметров образца (толщины образца, длины образца), шероховатости границ (среднеквадратичной шероховатости, длины корреляции) и свойств фононного газа (температуры, длины волны фононов, направления волнового вектора и теплового потока, поляризации).

2. Разработана модель расчета эффективной теплопроводности полупроводниковых пленок, которая базируется на детальном рассмотрении процессов взаимодействия фононов с реальной (шероховатой) границей образца с учетом температуры, длины и толщины плёнок, анизотропии, шероховатости.

### **Практическая значимость работы**

1. Показана необходимость анализа шероховатости поверхности при экспериментальном определении теплопроводности. В настоящее время этому вопросу не уделяется должного внимания, опытные данные весьма скудные. Во-первых, требуется оценка параметров профиля реальной (шероховатой) поверхности наноструктур – среднеквадратичной шероховатости (средней высоты) и длины корреляции (базовой длины), комбинация которых образует среднеквадратичный угол наклона профиля. Во-вторых, необходимо изучение углов наклона реального профиля поверхности наноструктур (определение вероятностной плотности распределения углов наклона), так как на данный момент общепринятым является распределение Гаусса и требуется подтверждение его применимости для различных поверхностей наноструктур.

2. Разработанный метод учёта взаимодействия фононов с шероховатой границей образца может быть использован для моделирования теплопереноса с учетом реальной (шероховатой) границей наноструктур и определения теплофизических свойств (эффективной теплопроводности, сопротивлений Капицы и пр.).

3. Разработанный метод расчета эффективной теплопроводности наноплёнок может быть использован при разработке полупроводниковых структур с необходимыми теплофизическими свойствами в зависимости от ряда определяющих параметров: температуры, толщины и длины плёнок, и шероховатости поверхности образца.

### **Основные положения диссертации, выносимые на защиту**

1. Статистическая модель шероховатой поверхности, метод расчёта взаимодействия фононов с такими поверхностями и определения длин свободного пробега баллистических фононов.

2. Модель расчета эффективной теплопроводности пленок в широком диапазоне температур и толщин пленок с учетом размерного эффекта и параметров

шероховатости (среднеквадратичной шероховатости и длины корреляции).

3. Результаты анализа факторов, влияющих на рассеяние фононов на границе образца: температуры, шероховатости, толщины и длины плёнки, поляризации фононов, направления распространения теплового потока (угла наклона при падении фононов на поверхность).

4. Результаты расчетов длин свободного пробега баллистических фононов и эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины и различных параметров шероховатости.

#### **Личный вклад автора**

Представленные результаты были получены автором самостоятельно либо при его непосредственном участии. В частности, предложена модель описания реальной (шероховатой) границы образца на основе теории случайных поверхностей. Разработан статистический метод расчета взаимодействия фононов с шероховатой границей образца; метод расчета длины свободного пробега баллистических фононов при взаимодействии с шероховатой границей пленок; модель расчета эффективной теплопроводности пленок с учетом размерного эффекта и многофакторного характера рассеяния фононов на шероховатой границе. Разработаны программные коды, позволяющие проводить расчет эффективной теплопроводности пленок кремния в широком диапазоне температур, толщин и длин плёнок, параметров шероховатостей границ образца.

#### **Апробация работы**

Основные результаты работы были представлены на следующих конференциях: XXI Школа-семинар молодых ученых и специалистов под руководством акад. РАН А.И. Леонтьева «Проблемы газодинамики и теплообмена в энергетических установках» (Санкт-Петербург, 2017 г.); Международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (Москва, 2017 г.); XV Курчатовская междисциплинарная молодежная научная школа (Москва, 2017 г.); Всероссийской конференции «Студенческая научная весна» (Москва, 2018 г.); XV Российская конференция (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (Москва, 2018 г.); Седьмая Российская национальная конференция по теплообмену (Москва, 2018 г.); V международная конференция и молодежная школа «Информационные технологии и нанотехнологии» (Самара, 2019 г.); Всероссийская научно-техническая конференция молодых учёных и специалистов «Авиационные двигатели и силовые установки» (Москва, 2019 г.); Всероссийская конференция с элементами научной школы для молодых ученых «XXXV Сибирский теплофизический семинар», посвящённый 75-летию д.т.н., профессора В.И. Терехова (Новосибирск, 2019 г.); Всероссийская научная конференция с международным участием «Семинар вузов по теплофизике и энергетике» (Санкт-Петербург, 2019 г.); III международная конференция «Современные проблемы теплофизики и энергетики» (Москва, 2020 г.); VI Всероссийская конференция «Теплофизика и физическая гидродинамика» (Севастополь, 2021 г.); Всероссийская научная конференция «XII Семинар ВУЗов по теплофизике и энергетике» (Сочи, 2021 г.); III международная конференция «Математическое моделирование в материаловедении электронных

компонентов» (Москва, 2021 г.).

Также результаты представлены на научном семинаре Теоретического отдела им. Л.М. Бибермана ОИВТ РАН (Москва, 2022 г.), на семинарах кафедры теплофизики МГТУ им. Н.Э. Баумана (Москва, 2020 г. и 2022 г.).

### Публикации

Основные результаты по теме диссертации отражены в 9 научных публикациях, из них 4 статьи из Перечня рецензируемых научных журналов ВАК РФ, 7 работ в изданиях, входящих в международные базы цитирования Scopus, и 4 работы – Web of Science. Общий объём 3,35 п.л.

### Структура и объём работы

Диссертация состоит из введения, 4 глав, заключения и списка литературы. Работа изложена на 128 страницах, содержит 54 рисунка и 2 таблицы. Библиографический список содержит 135 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

**Во введении** обоснована актуальность работы, сформулированы цели и задачи исследования, сформулированы положения, определяющие новизну и практическую ценность полученных результатов, а также положения, выносимые на защиту; кратко изложено содержание глав диссертации.

**Глава 1** посвящена обзору и сравнению существующих методов и подходов к расчету теплопроводности. В выводах сформулированы основные задачи исследования.

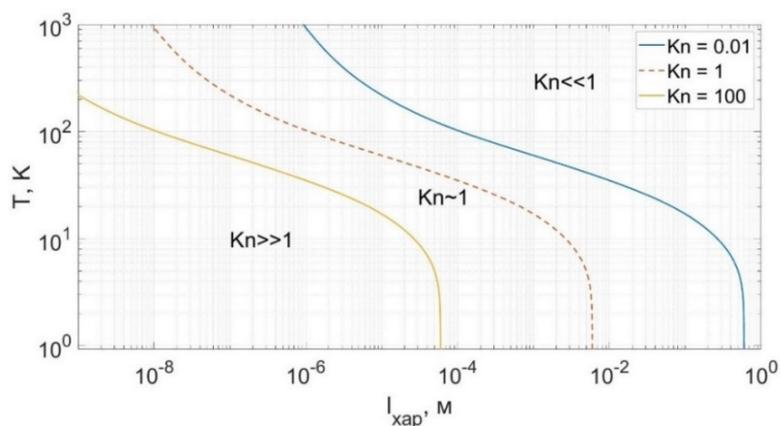
Переносчиками тепла в полупроводниках и диэлектриках являются квазичастицы фононы – кванты упругих волн, распространяющихся в твёрдых телах. Выражение для расчета теплопроводности следует из решения уравнения переноса Больцмана для фононов в приближении времени релаксации  $\tau$  – время релаксации фононного газа, с.

$$\kappa(T) = \sum_j \int C_{ph} v_{g,j} l_j \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}, \quad (1)$$

где суммирование ведется по поляризациям  $j$ ;  $T$  – температура твердого тела, К;  $C_{ph}$  – фононная теплоемкость,  $C_{ph}(\omega, T) = \hbar\omega \partial f_0 / \partial T$ ;  $v_{g,j}$  – групповая скорость фонона,  $v_{g,j} = d\omega/dk$ ;  $\omega$  – частота волны, с<sup>-1</sup>;  $\mathbf{k}$  – волновой вектор, м<sup>-1</sup>;  $f_0$  – равновесная функция Бозе-Эйнштейна;  $l_j$  – длина свободного пробега фонона,  $l_j = v_{g,j} \tau$ ;  $\tau$  – время релаксации фононного газа, с;  $\omega = f_j(\mathbf{k})$  – дисперсионные соотношения.

При уменьшении характерных размеров образца  $L$  до значений меньше длин свободного пробега фононов в макроскопическом образце  $l_\infty$  влияние границ становится существенным и даже определяющим, а влияние внутренних процессов взаимодействия (фононов друг с другом или с нерегулярностями решетки) менее ощутимо. В связи с этим, вводя безразмерный параметр – число Кнудсена,  $\text{Kn} = l_\infty / L$ , в структурах микро и наномасштаба выделяют два типа теплопереноса: 1. баллистический режим,  $\text{Kn} \gg 1$ , когда длины свободного пробега переносчиков

теплоты – фононов в макроскопических образцах – во много больше характерного размера рассматриваемого образца; фононы почти не взаимодействуют друг с другом, свободно распространяются внутри структуры и рассеиваются на границе образца; 2. диффузионно-баллистический,  $Kn \sim 1$ , когда часть фононов участвует в баллистическом переносе, а часть в диффузионном, соответствующем классическому закону теплопроводности в макроскопическом образце.



**Рис. 1.** Оценка режима теплопереноса для кремния:  $Kn \ll 1$  – диффузионный;  $Kn \sim 1$  – диффузионно-баллистический;  $Kn \gg 1$  – баллистический режим.

На основе выражения (1) сформулирован метод оценки режима теплопереноса по числу Кнудсена. В качестве примера выполнен расчет для кремния и получена диаграмма (Рис. 1), которая позволяет оценить режим теплопереноса в зависимости от величины характерного размера образца,  $l_{хар}$ , и температуры,  $T$ .

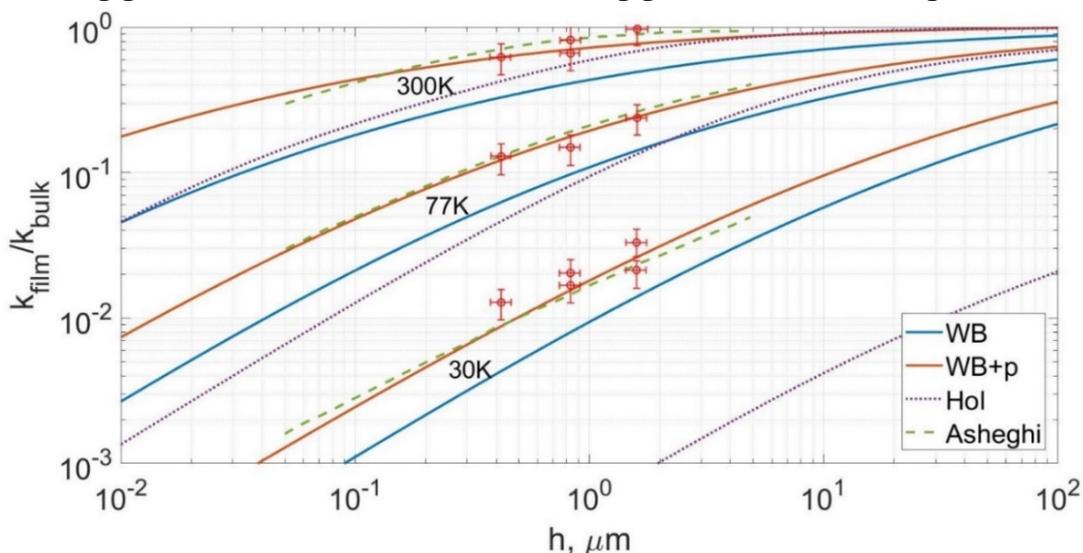
Существующие теории теплопроводности, учитывающие размерный эффект, строятся на оценке длины пробега баллистических фононов в зависимости от числа Кнудсена. Среди наиболее распространенных выделим подход Фукса-Зондхаймера и подход Казимира-Бермана. Общим является то, что влияние реальных (шероховатых) границ на теплопроводность заменяется параметром зеркального отражения  $p$ , который характеризует характер процессов взаимодействия – долю фононов, отраженных от поверхности зеркально,  $p$ , или диффузно,  $1 - p$ .

При этом взаимосвязь параметра зеркального отражения со свойствами реальной шероховатой границы удастся установить только для ряда частных случаев.

В одном из наиболее распространенных подходов к расчету параметра зеркального отражения является модель Казимира-Займана-Соффера [2], согласно которой связь между параметром  $p$  и высотой шероховатости  $\sigma$  определяется соотношением:  $p = \exp(-2\sigma^2 k^2 \cos^2 \theta)$ , где  $k$  – волновое число фонона с длиной волны  $\lambda$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ ;  $\theta$  – угол падения волны относительно нормали к средней линии поверхности. Важно подчеркнуть следующие слабые стороны данного подхода. Во-первых, граница образца моделируется лишь высотами шероховатости, распределёнными по случайному закону Гаусса, без учета пространственной конфигурации шероховатостей (нулевая длина корреляции). Во-вторых, непосредственное взаимодействие фононов с шероховатостями не рассматривается, а задача заменяется на определение сдвига фаз отраженной волны в зависимости от соотношения между длиной волны и высотой шероховатости. Существуют и другие модели, к примеру модель Мазнев, где рассматривается обратный случай – существенное влияние длин шероховатостей, но при условии

нормального падения фононов на границу. Более того, в ряде широко известных пакетов-решателей, к примеру almaBTE, параметр зеркального отражения используется как граничное условие при определении эффективной теплопроводности и задается в качестве постоянной величины (в отсутствие взаимосвязи с шероховатостью образца). Общим для рассмотренных подходов является то, что параметр  $p$  не удается однозначно связать со свойствами реальной (шероховатой) поверхности, а именно высотами и длинами шероховатости.

Из проведенного анализа следует, что параметр зеркального отражения в существующих моделях теплопроводности играет роль подгоночного параметра. На основе проведенных расчетов эффективной теплопроводности пленок кремния (Рис. 2) показано, что варьирование  $p$  от 0 до 1 приводит к широкому разбросу значений эффективной теплопроводности и сильной неопределенности результата. Это обстоятельство не позволяет использовать существующие методы учета размерного эффекта для адекватной оценки эффективной теплопроводности.



**Рис. 2.** Эффективная теплопроводность вдоль пленок кремния в диапазоне толщин от 10 нм до 100 мкм: WB – модифицированная модель Фукса-Зондхаймера при условии диффузного отражения ( $p=0$ ); WB+p – та же модель при  $p=0.4, 0.5$  и  $0.8$  для температур  $T=30$  К,  $70$  К и  $300$  К, соответственно; Hol – модель Холленда при  $p=0$ . Asheghi – результаты расчета по модели Ашеги; точки – экспериментальные данные Джу-Гудсон.

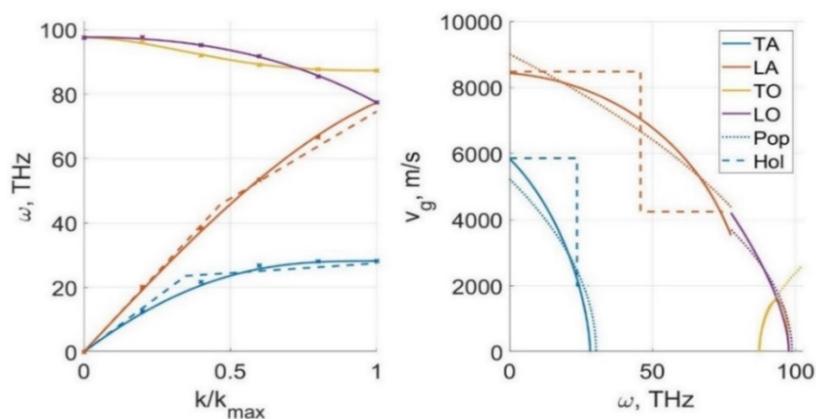
Таким образом, общим недостатком существующих моделей переноса тепла в наноструктурах является отсутствие учета структуры реальной шероховатой границы и статистической теории взаимодействия фононов с такой границей твердого тела. И, как следствие, невозможно установить влияние параметров шероховатости (высот, длин корреляции и пр.) и свойств фононного газа (температуры, анизотропии потока фононов и пр.) на теплоперенос. Поэтому возникает фундаментальная задача разработки новой модели расчета процессов взаимодействия фононов с шероховатыми границами твердых тел, определения длины пробега баллистических фононов и расчету эффективной теплопроводности.

**В главе 2** проведен анализ факторов (параметров), которые необходимо

учитывать при рассмотрении теплопереноса и расчете эффективной теплопроводности наноструктур. Выделим следующие основные тезисы из проведенного анализа.

Во-первых, принципиальным является то, что анализ теплопереноса в полупроводниках и диэлектриках строится на рассмотрении статистики фононного газа, состояние которого в целом определяется **температурой** (статистика Бозе-Эйнштейна).

Во-вторых, свойства фононного газа зависят от свойств кристаллической решетки, в частности, от **модели дисперсии**. Так в материалах с алмаз-подобной кристаллической решеткой (кремний, германий, алмаз) фононный газ состоит из акустических и оптических фононов продольной и поперечной **поляризации**. В данной работе для описания дисперсии применяется полиномиальная аппроксимация реальных дисперсионных кривых вместо широко распространенных линейного, двулинейного и кубического законов. Это дает возможность более строго рассмотреть динамику фононов в кристаллической решетке (Рис. 3).



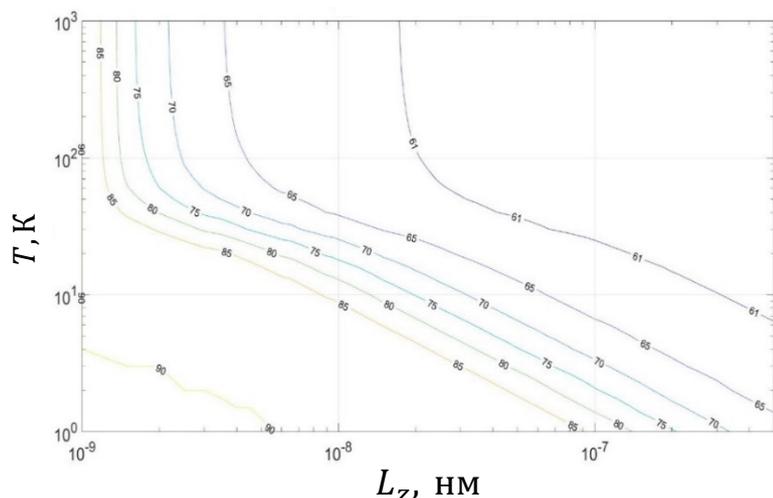
**Рис. 3.** Дисперсионные кривые и групповые скорости для кремния в направлении [100]. TA и LA – поперечная и продольная акустические волны, TO и LO – поперечная и продольная оптические волны. Точками указаны экспериментальные данные, сплошные линии – полиномиальная аппроксимация, «Pop» – кубическая, «Hol» – двулинейная.

Дисперсионные соотношения необходимы при определении скоростей (групповых и фазовых), а также длин волн фононов. Так на Рис. 4 проведена оценка длин волн фононов на основе расчета вклада различных длин волн фононов в теплопроводность. Оказалось, что существенный вклад в теплоперенос вносят фононы с длинами волн больше или порядка размеров шероховатостей.

В-третьих, наличие размерного эффекта, приводит к непосредственному влиянию геометрии образца (**толщины пленки**, ширины, радиус изгиба и пр.) на возможные (разрешенные) состояния фононов и, как следствие, на свойства фононного газа в целом (теплопроводность). В том числе появляется выраженная **анизотропия свойств** в поперечном и продольном направлении пленок. Это

Отметим, что в работе рассматривается квазиизотропное приближение и свойства в направлении [100] кристаллической решетки, вдоль которого поперечные волны являются вырожденными (ветви совпадают:  $TA_1=TA_2=TA$ ). Также не учитываются оптические моды в виду малых скоростей их распространения. Как показано в ряде работ по расчету теплопроводности из первых принципов, данное допущение дает ошибку в пределах 5% для широкого диапазона температур.

связано с тем, что в продольном направлении возможен лишь ограниченный дискретный набор состояний, равный количеству полувольт фононов, укладывающихся по толщине пленки. В то время, как в продольном направлении такие ограничения отсутствуют и можно говорить о непрерывном наборе состояний. Поэтому эффективная теплопроводность зависит от рассматриваемого **направления распространения тепла** в наноструктурах.



**Рис. 5.** Зависимость среднего угла распространения фононов от толщины  $L_z$  и температуры  $T$

Проведена оценка среднего угла распространения фононов при заданной толщине и температуре плёнок. Расчеты, см. Рис. 5 показали, что фононы распространяются в пленках преимущественно при скользких углах ( $\theta > 60^\circ$ ). При этом средний угол увеличивается до  $80^\circ$  и достигает  $90^\circ$  для наноплёнок (при комнатной температуре, 300 К).

В-четвертых, как отмечалось в главе 1, существенную роль в теплопереносе оказывает **взаимодействие баллистических фононов с шероховатыми границами наноструктур**. Это фундаментальная и основополагающая задача, без решения которой невозможно создать надежный и достоверный метод расчета эффективной теплопроводности. Подчеркнем, что природа как самого процесса взаимодействия, так и шероховатости границы образца, является статистической, поэтому задача должна решаться статистическими методами. В частности, эксперименты показывают, что на эффективную теплопроводность наноструктур (на примере нанонитей) влияют **среднеквадратичная шероховатость и длина/интервал корреляции**. В целом стоит отметить, что вопрос о детальном рассмотрении структуры реальной поверхности и о влиянии ее морфологии на теплоперенос слабо освещены в литературе; не смотря на определяющее влияние процесса рассеяния фононов на шероховатой границе образца на теплоперенос.

Таким образом показано, что задача расчета теплопроводности является многопараметрической. Проанализировано влияние различных определяющих величин на теплоперенос. В частности, показано, что необходима разработка новой модели взаимодействия фононов с шероховатой границей, учитывающей значение среднеквадратичной шероховатости поверхности и интервал корреляции.

**Глава 3.** Данная глава посвящена изучению взаимодействия фононов с шероховатыми границами наноструктур. Эта проблема пока что практически не исследована и представляет собой одно из «белых пятен» нанотеплофизики.

Данная проблема отсутствует в классической теплофизике. Дело в том, что из-за малости размеров наноструктур фононы чаще взаимодействуют с границами твёрдых тел, чем друг с другом, как это имеет место в макросистемах. Поэтому при

$Kn > 1$  теплопроводность наноструктур в большей степени зависит от взаимодействий фононов с границами, чем от фонон-фононных взаимодействий. Главным параметром, учитывающим такое взаимодействие при расчёте теплопроводности, является вероятность зеркального отражения от границы, обозначаемая, как  $p$ . В большинстве работ, посвящённых расчётам теплопроводности наноструктур, величина  $p$  используется, как подгоночный параметр. Сложность этой задачи связана с тем, что границы твёрдых тел представляют собой шероховатые поверхности со случайными распределениями формы. При этом надо иметь в виду, что фононы – кванты упругих волн, распространяющихся в твёрдых телах, поэтому следует учитывать их волновые свойства.

Предложен следующий статистический метод изучения взаимодействия волн с шероховатыми поверхностями. Представим процесс последовательного взаимодействия фононов с шероховатыми границами как комбинацию двух процессов, сменяющих друг друга.

**1) Процесс рассеяния на шероховатой границе**, т.е. непосредственный расчет изменения импульса фонона в процессе взаимодействия с шероховатой границей. Анализ строится на следующих допущениях. Рассматриваются случайная двумерная поверхность  $z = \zeta(x, y)$  с образующими вдоль оси  $y$  (Рис. 6), для которой углы наклона (модуль производной  $n = |\nabla\zeta|$ ) распределены по закону Гаусса. Так как угол наклона профиля  $\varphi$  связан с градиентом  $n = |\nabla\zeta|$  в соответствии с соотношением  $n = \tan\varphi$ , тогда распределение по углам наклона примет вид:

$$w(\varphi) = \frac{1}{\gamma\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\tan^2\varphi}{2\gamma^2}\right) \frac{1}{\cos^2\varphi}, \quad (-\pi/2 \leq \varphi \leq \pi/2). \quad (2)$$

Обратим внимание, что для описания шероховатой поверхности необходимо задать два параметра: среднеквадратичное значение шероховатости  $\sigma$  (высота) и интервал корреляции  $l$  (длина), при этом дисперсия первой производной  $(\zeta')^2 \equiv \gamma^2$  определяется по выражению  $\gamma = \sigma/l$ .

Затем к профилю поверхности применяем приближение Кирхгофа – рассмотрим касательные плоскости, от которых происходит отражение фононов. Тогда для произвольного фонона, распространяющегося под углом  $\theta$  к нормали поверхности пленки, угол отражения составит  $\psi = \theta - 2\varphi$ , где  $\varphi$  – угол наклона касательной плоскости к средней линии профиля (Рис. 6).

**2) процесс распространения от одной границы к противоположной.** Рассматривается баллистический режим переноса, при котором отсутствуют внутренние процессы взаимодействия (фонон-фононные и рассеяние на неоднородностях решетки). Траектория движения фононов между границами считается линейной, а скорость распространения, зависящей от частоты фонона. Так для фонона, отраженного от шероховатой границы под углом  $\psi = \theta - 2\varphi$  к нормали пленки, длина свободного пробега запишется как

$$l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) = \frac{L}{\cos(\theta - 2\varphi)}. \quad (3)$$

Данную длину свободного пробега будем именовать локальной (индекс *local*). Обратим внимание, что локальная неоднородность поверхности учитывается через угол  $\varphi$ , значение которого меняется в диапазоне от  $\varphi_{\min}$  до  $\varphi_{\max}$ , определяемым допустимыми значениями углов отражения  $\psi = \theta - 2\varphi$ , в зависимости от угла падения  $\theta$  и локальным углом наклона профиля  $\varphi$  (из анализа Рис. 6).

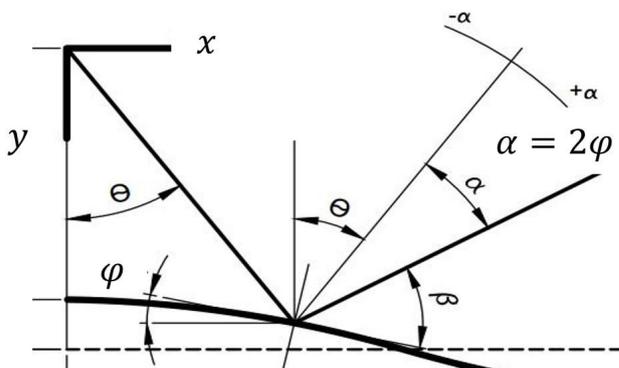
Следующий шаг – учет шероховатости границы. Для этого воспользуемся функцией распределения углов наклона (2) с учетом выражения (3) и определим среднюю длину свободного пробега  $l_b$  между взаимодействиями фононов с шероховатой границей, осредненную по углам наклона шероховатого профиля

$$l_b(\gamma, \theta, L) = \int_{\Phi} w_{\theta}(\varphi, \gamma) l_{b,loc}(\theta, \varphi, L) d\varphi = L b_s(\gamma, \theta). \quad (4)$$

где  $\Phi \in [\varphi_{\min}, \varphi_{\max}]$ , а значение **форм-фактора**  $b_s(\gamma, \theta)$  не является постоянным, как в классической теории размерного эффекта, а **становится зависящим от градиента наклона шероховатого профиля**  $\gamma$  и угла падения  $\theta$

$$b_s(\gamma, \theta) = \int_{-\varphi_{\max}}^{\varphi_{\max}} \frac{w_{\theta}(\varphi, \gamma)}{\cos(\theta - 2\varphi)} d\varphi. \quad (5)$$

Полученное выражение обладает той же особенностью, что и классические формулы (Займана, Соффера и пр.): при стремлении угла отражения  $\psi = \theta - 2\varphi$  к  $\pi/2$ , т.е. когда фононы распространяются преимущественно вдоль образца (случай скользящих углов), форм-фактор и длина свободного пробега фононов



**Рис. 6.** Основные геометрические параметры при отражении фононов от шероховатой границы:  $\theta$  – угол падения;  $\varphi$  – угол, характеризующий наклон профиля относительно средней линии;  $\beta$  – угол «отражения»;  $\alpha = 2\varphi$  – угол, характеризующий разницу между зеркальным отражением и диффузным. Указанные углы задаются относительно нормали к поверхности.

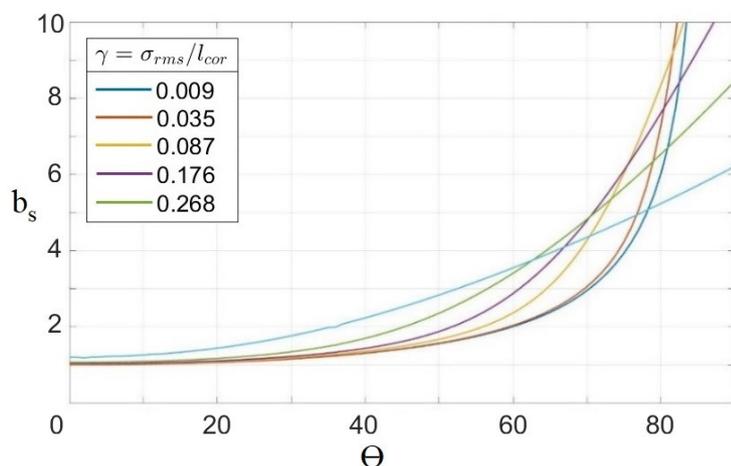
неограниченно возрастают (как следствие, и теплопроводность). Однако, при анализе распространения теплоты в реальном образце известно, что длина свободного пробега конечна, так как размеры образца ограничены во всех трёх направлениях, а не только по толщине (для плёнок). Поэтому нужно учитывать, что рассеяние фононов в пленках происходит не только на поверхностях, ограничивающих образец по толщине, но также по ширине и длине.

Отдельно обратим внимание на диффузионно-баллистический режим теплопереноса (при числах Кнудсена порядка единицы),

когда длина пробега фононов будет ограничена внутренними процессами

взаимодействия, такими как рассеяние на дефектах и неоднородностях решетки, фонон-фононными процессами и пр. В этом случае необходимо в качестве длины свободного пробега выбирать наименьшее значение между длиной баллистических фононов (4) и длиной пробега, соответствующей внутренним процессам взаимодействия фононов.

Результаты расчета форм-фактора (5) представлены на Рис. 7. Обратим внимание, что в классической теории величина  $b_s$  постоянная и равна 0,8 для пластины. Заметим, что при угле наклона профиля  $\gamma = 0$  поверхность гладкая, а зависимость  $b_s(\gamma, \theta)$  подчиняется закону косинуса  $b_s(\theta) = \cos^{-1} \theta$ . При увеличении  $\gamma$  зависимость форм-фактора меняется. Так при малых углах падения  $\theta$  значение  $b_s$  постоянно и слабо зависит от  $\gamma$ , а при скользких углах падения величина  $b_s$  неограниченно растёт, что связано с отсутствием препятствий на пути распространения отраженных фононов. А при росте крутизны профиля  $\gamma$  фононы чаще сталкиваются с границей образца, поэтому значение  $b_s$  растет до конечной величины.



**Рис. 7.** Зависимость форм-фактора (5) от угла падения  $\theta$  и градиентов наклона профиля  $\gamma$ .

Форм-фактор имеет достаточно простую и наглядную интерпретацию – он показывает, во сколько раз длина свободного пробега фононов превосходит толщину образца. Так, при движении фононов по нормали к поверхности длина пробега  $l_b$  ограничена толщиной образца  $L_z$ , а при скользких углах отражения наблюдается значительный рост длины пробега в  $b_s$ -раз.

Таким образом, предложен совершенно новый метод анализа процессов рассеяния фононов на шероховатой границе твердого тела, базирующийся на рассмотрении углов наклона случайной шероховатой поверхности и статистическом анализе углов отражения фононов от такой поверхности. Продемонстрировано применение разработанного метода для расчета длин свободного пробега фононов между последовательными взаимодействиями с границей твердого тела. Отмечен ряд принципиальных отличий от существующих моделей. Во-первых, это учет влияния крутизны шероховатого профиля на длину пробега баллистических фононов. Во-вторых, разработанный метод позволяет оценить влияние не только «относительно гладких» границ, когда длины корреляции малы, что имеет место в существующих теориях; но и установить влияние «относительно крутых» шероховатостей, что, как показывают эксперименты, имеет место для случая атомарной шероховатости в наноструктурах.

**В главе 4** сформулирована модель расчета эффективной теплопроводности

пленок с учетом факторов, влияющих на теплоперенос и рассмотренных в главе 2, а также с учетом новой статистической модели взаимодействия фононов с шероховатой границей, предложенной в главе 3.

Расчетное выражение для эффективной теплопроводности вдоль плёнок с учетом размерного эффекта и анизотропии может быть записано в следующей форме:

$$k_{film}(L_z, T, \gamma, j) = \sum_{k_z} \left( \int_{k_{min}}^{k_{max}} C_{ph}[\omega_j(k), T] v_{g,j}(k) l_b[\gamma, \theta(k, k_z), L_z] \cos\langle \widehat{\mathbf{k}}, \mathbf{q} \rangle \frac{k dk}{6\pi^2} \right) \Delta k_z,$$

$$C_{ph}[\omega_j(k), T] = \hbar \omega_j(k) \frac{\partial f_{BE}[\omega_j(k), T]}{\partial T}, \quad (6)$$

где  $\omega$  – частота фонона,  $j$  – поляризация,  $C_{ph}$  – фононная теплоемкость,  $C_{ph} = \hbar \omega \cdot \partial f_{BE} / \partial T$ ;  $f_{BE}$  – функция распределения Бозе-Эйнштейна,  $f_{BE} = [\exp(\hbar \omega / k_B T) - 1]^{-1}$ ;  $v_{g,j}$  – групповая скорость фононов;  $\theta$  – угол наклона падающей волны;  $l_j$  – длина свободного пробега фононов. Обратим внимание, что выражение (6) в предельном случае  $L_z \rightarrow \infty$  переходит в известное выражение для теплопроводности изотропного макроскопического образца. Величина  $\langle \widehat{\mathbf{k}}, \mathbf{q} \rangle$  характеризует угол между направлением теплового потока (вдоль или поперёк плёнки) и направлением волнового вектора, при этом  $\langle \widehat{\mathbf{k}}, \mathbf{q} \rangle = \pi / 2 - \theta$ , где угол  $\theta$  зависит от модуля волнового вектора  $\mathbf{k}$  и его проекции на нормаль плёнки  $k_z$ .

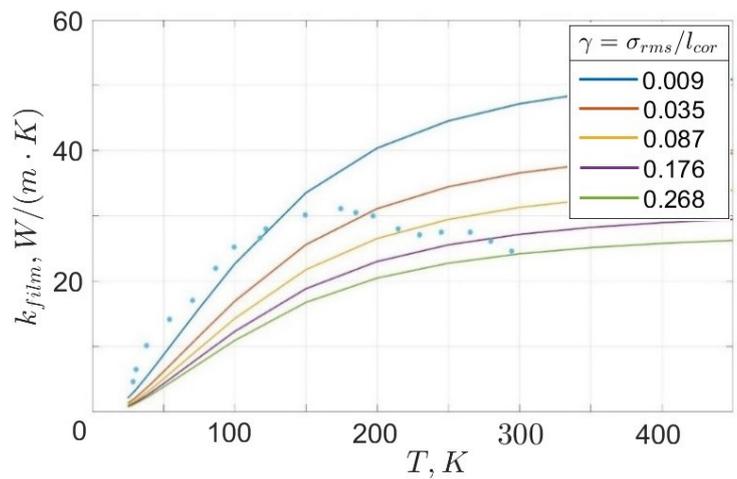
Подчеркнём принципиальные отличия выражения (6) от существующих широко распространенных моделей. Во-первых, учёт взаимодействия фононов с границами образца строится на рассмотрении градиентов наклона статистически случайной поверхности, моделирующей реальную шероховатую границу образца (глава 3). Во-вторых, так как конечная толщина пленки (размерный эффект) приводит к существованию ограниченного набора состояний в поперечном направлении, то в выражении (6) проводится непосредственное суммирование по разрешенным волновым числам в поперечном направлении,  $k_z$ . А интегрирование в выражении (6) проводится относительно  $k$ -пространства (пространства обратной решетки), а не частот, что широко используется при рассмотрении изотропного приближения. Таким образом учтена анизотропия пространства состояний. В-третьих, перенос теплоты осуществляется в продольном направлении, что учитывается путем рассмотрения проекции волнового вектора на направление вдоль пленки. Более того, можно обобщить выражение провести (6) на случай расчета эффективной теплопроводности поперек плёнки.

Результаты расчета эффективной теплопроводности вдоль тонких плёнок кремния представлены на Рис. 8 и 9 и сопоставлены с имеющимися экспериментальными данными. Так на рис. 8 для плёнки толщиной 20 нм в рассматриваемом диапазоне температур основной механизм переноса тепла –

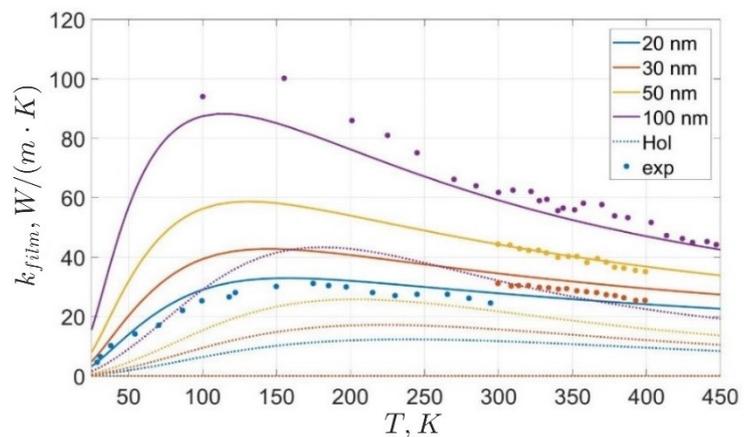
баллистический, поэтому наблюдается хорошее согласие с опытными данными. Однако, при больших толщинах и температурах начинают играть роль внутренние процессы взаимодействия (фонон-фононные и рассеяние на дефектах или изотопах), поэтому согласно Рис. 1 необходимо рассмотрение диффузионно-баллистического режима переноса.

На Рис. 9 представлены результаты расчета эффективной теплопроводности тонких плёнок с учетом баллистических фононов и внутренних процессов взаимодействия (фонон-фононными и на неоднородностях решетки), что позволило получить хорошее согласие с экспериментальными данными не только в области  $Kn \gg 1$  (как на Рис. 8), но и при  $Kn \sim 1$ , т.е. в диффузионно-баллистическом режиме теплопереноса. Пунктирными линиями для сравнения показан расчет по модели Фукса-Зондхаймера при чисто диффузном отражении от границы ( $p = 0$ ) с применением подхода Холленда для расчета теплопроводности макроскопического образца. Видно, что варьирование  $p$  от 0 до 1 способно оказать существенное влияние на результат.

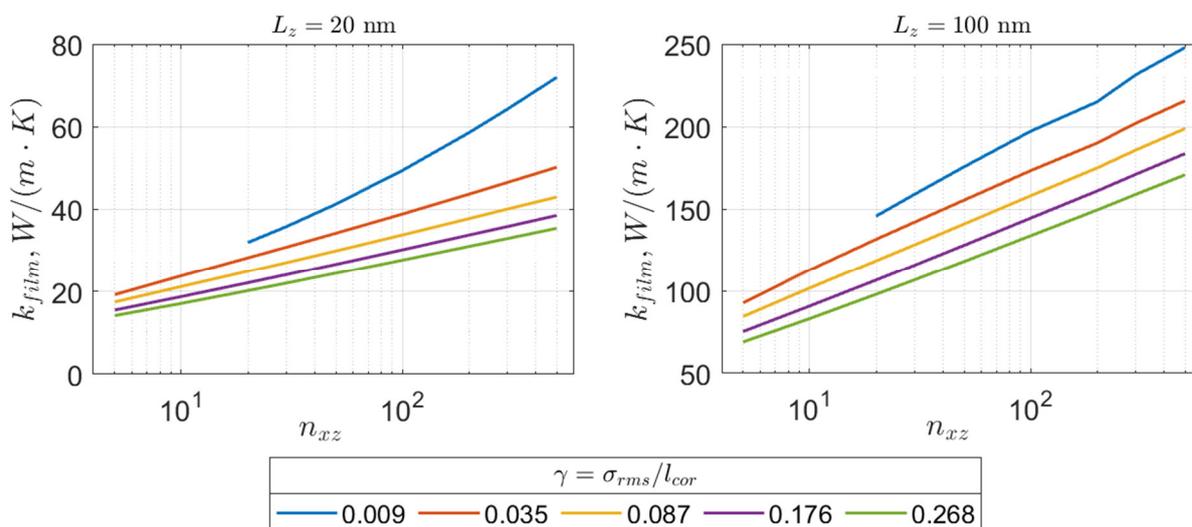
Следующая задача – установление влияния длины плёнки на теплопроводность. Во многих существующих работах по эффективной теплопроводности плёнок данный вопрос обходится стороной. Введем величину  $n_{xz} = L_x / L_z$ , характеризующую соотношение между длиной пленки  $L_x$  и ее толщиной  $L_z$ . В соответствии с разработанной моделью на Рис. 10 представлены результаты расчета продольной теплопроводности плёнок в зависимости от длины и толщины пленки, параметров шероховатости (длины корреляции и среднеквадратичной высоты), а также температуры.



**Рис. 8.** Эффективная продольная теплопроводность плёнок кремния толщиной 20 нм. Линии соответствуют градиентам наклонов 0,009 (0.5°), 0,035 (2°), 0,087 (5°), 0,176 (10°) и 0,268 (15°); точки – экспериментальные данные Ашеги.



**Рис. 9.** Эффективная теплопроводность вдоль плёнок кремния. Сплошные линии – модель авторов; пунктирные линии – модель Фукса-Зондхаймера; точки «exp» – экспериментальные данные Ашеги.



**Рис. 10.** Эффективная теплопроводность вдоль пленок кремния при температуре 300К в зависимости от  $n_{xz} = L_x/L_z$  для толщин  $L_z$  20 и 100 нм. Линии соответствуют различным градиентам наклона профиля шероховатой поверхности  $\gamma$ .

Таким образом, результаты расчетов эффективной теплопроводности вдоль пленок кремния показали хорошее согласие с имеющимися экспериментальными данными. Существенным является то, что на практике при проведении экспериментов рассматривается лишь влияние толщины пленок на теплопроводность (т.е. лишь размерный эффект). При этом анализу шероховатости поверхности образца, которая существенно влияет на теплоперенос, не оказывается должного внимания, а имеющихся опытных данных недостаточно для всестороннего анализа теплопереноса.

## ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ВЫВОДЫ

1. Развита новая теоретическая основа расчёта процессов рассеяния фононов на шероховатых поверхностях наноструктур, основанная на статистической теории случайных шероховатых поверхностей и анализе углов отражения от таких поверхностей.

2. Разработан метод расчета длины свободного пробега баллистических фононов при рассеянии от реальных шероховатых поверхностей пленок.

3. Разработана модель расчета эффективной теплопроводности тонких полупроводниковых плёнок в баллистическом режиме теплопереноса, которая не содержит подгоночных параметров и базируется на детальном рассмотрении процессов взаимодействия фононов с шероховатой границей образца.

4. Разработан программный код для расчета эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины пленки и шероховатости поверхности.

5. Получены результаты расчета эффективной теплопроводности пленок кремния в зависимости от температуры, толщины пленки и шероховатости образца (среднеквадратичных углов шероховатого профиля).

6. Получены диаграммы, позволяющие определить механизм переноса

теплоты (диффузионный, диффузионно-баллистический или баллистический) в зависимости от температуры и толщины пленки кремния.

7. Показана необходимость анализа шероховатости поверхности при экспериментальном определении теплопроводности. В настоящее время этому вопросу не уделяется должного внимания, опытные данные весьма скудные, и это накладывает существенные ограничения на дальнейшее совершенствование и создание надежных методов расчета теплофизических свойств наноструктур.

## ОСНОВНЫЕ ПУБЛИКАЦИИ

1. Баринов А.А., Цао Ж., Хвесьюк В.И. Баллистический перенос тепла в наноструктурах // Наука и образование: научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2016. № 5. С. 140-151. (1,03 п.л./0,40 п.л.)

2. Развитие методов расчета теплопроводности тонких пленок. / А.А. Баринов [и др.] // Наука и Образование: Научное издание МГТУ им. Н.Э. Баумана. 2017. № 6. С. 56-71. (1,41 п.л./0,7 п.л.)

3. Updated Model for Thermal Conductivity Calculation of Thin Films of Silicon and Germanium / A.A. Barinov [et al.] // Physics of Atomic Nuclei. 2020. V. 83, No. 10. P. 1538-1548. (1,27 п.л./0,7 п.л.)

4. Liu B., Khvesyuk V.I., Barinov A.A. The modeling of the Kapitza conductance through rough interfaces between solid bodies // Physics of the Solid State. 2021. V. 63, No. 7. P. 982-987. (0,64 п.л./0,2 п.л.)

5. Effect of interfacial roughness on thermal boundary conductance: An elastic wave model using the Kirchhoff approximation / B. Liu [et al.] // International Journal of Mechanical Sciences. 2022. V. 218, No. 106993. (1,21 п.л./0,2 п.л.)

6. Khvesyuk V.I., Barinov A.A. Hierarchy of models for calculating the thermal conductivity in nanostructures // Journal of Physics: Conference Series. 2017. V. 891, No. 012352. (0,60 п.л./0,3 п.л.)

7. A review to the specific problems of nano thermal physics / V.I. Khvesyuk [et al.] // Journal of Physics: Conference Series. 2020. V. 1683, No. 022073. (0,58 п.л./0,2 п.л.)

8. Barinov A.A., Khvesyuk V.I. Statistical model of phonon scattering on rough boundaries of nanostructures // Journal of Physics: Conference Series. 2021. V. 2057, No. 012111. (0,60 п.л./0,4 п.л.)

9. Barinov A.A., Liu B., Khvesyuk V.I. A new technique for modelling phonon scattering processes at rough interfaces and free boundaries of solids // Journal of Physics: Conference Series. 2022. V. 2150, No. 012021. (0,55 п.л./0,25 п.л.)